

термомеханическая тренировка: термоциклирование через интервал прямых и обратных МП под действием внешних сжимающих напряжений. В [001]-кристаллах, ДЭПФ с величиной $\varepsilon_{\text{ДЭПФ}}^{001} = (1,2 \pm 0,2) \%$ был реализован после тренировки при 150 МПа. В монокристаллах, ориентированных вдоль [110]-направления, после такой же тренировки было получено значение $\varepsilon_{\text{ДЭПФ}}^{110} = (0,7 \pm 0,2) \%$. В данной ориентации максимальное значение $\varepsilon_{\text{ДЭПФ}}^{110} = (1,0 \pm 0,2) \%$ наблюдается после тренировок под действием $\sigma_{\text{внеш}} = 350$ МПа. Однако, такая тренировка приводит к охрупчиванию монокристалла сплава $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$, ориентированного вдоль [110]-направлений.

Таким образом, на монокристаллах сплава $\text{Ni}_{51}\text{Fe}_{18}\text{Ga}_{27}\text{Co}_4$ исследована ориентационная зависимость ЭПФ и ДЭПФ при развитии МП в циклах охлаждения/нагрев под действием внешних сжимающих напряжений и в свободном состоянии. Показано, что наличие вклада раздвойникового кристаллов мартенсита в деформацию превращения при развитии МП под нагрузкой определяет величину термического гистерезиса ΔT , критические напряжения образования ориентированного мартенсита и величину ДЭПФ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 16-19-10250.

Список публикаций:

- [1] Sozinov A., Likhachev A.A., Lanska N., Ullakko K. // *Applied Physics Letters*. 2002. T. 80. P. 1746.
[2] Hamilton R.F., Sehitoglu H., Efsthathiou C., Maier H.J. // *Acta Materialia*. 2007. T. 55. P.4867.

Механическое диспергирование металлических стекол

Панишев Сергей Алексеевич

Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте

Соколова Наталья Марковна, к.ф.-м.н.

Panishef.serega@mail.ru

Для получения металлов в аморфном состоянии расплавленный металл льют на вращающийся барабан, на котором он быстро охлаждается. Скорость охлаждения при этом составляет 10^4 — 10^5 °C/с. Тогда кристаллическая решетка образовываться не успевает, структура материала остаётся однородной. Толщина аморфной ленты при этом меняется от 20 до 30 мкм. Ленты толщиной свыше 32 мкм отбраковывают. Замечено, что при этой толщине уже начинается процесс кристаллизации, теряется однородность. Тонкие аморфные ленты, как и все стекла, очень хрупкие и скользкие. При испытании на растяжение их очень сложно закрепить на установке, при этом образуются трещины. Они образуются ещё и потому, что при производстве у лент обрезают края. Это влияет на конечный результат механических испытаний, и приводит к большому разбросу полученных данных. Поэтому «получение достоверной информации маловероятно. Испытание на растяжение имеет существенные недостатки, часть из которых неустранима принципиально» [1].

В [2] была рассмотрена возможность судить о механических свойствах аморфных металлов: по энергии, затраченной на размельчение образца при трении его об абразив. В этом случае отделение каждой частицы с поверхности образца связано с теми же процессами, которые происходят при растяжении в месте его разрыва. При трении об абразив часть образца превращается в порошок, масса которого тем меньше, чем прочнее образец. Энергия (работа) — A , затраченная на его образование может быть определена на опыте по возникающей в процессе трения силе (она является суммой сил, приложенных к каждой из оторвавшихся частиц). Удельное значение этой энергии (работы) — a — будет характеризовать испытываемое вещество.

На установке для определения работы A против сил трения образец прижат к абразиву, скользящему под ним. Сила, с которой абразив увлекает образец, действует на упругое кольцо с тензодатчиками. Возникающий в датчиках сигнал принимает специально созданный для этого электронный блок, фиксирующий усилие через каждые 0,1с. Он же передает данные на компьютер, где в специальной программе чертится диаграмма зависимости силы, от пройденного образцом пути, и по ней вычисляется работа A по преодолению силы трения.

В [2] приведены результаты измерений удельной энергии диспергирования аморфных лент для восьми разных марок и их исходных материалов — металлов, находящихся в обычном кристаллическом состоянии. Оказалось, что ошибка в определении этой величины у лент и у монолитов одинакова — порядка десяти процентов. Значит, удельная работа диспергирования может служить достаточно стабильной характеристикой механических свойств металлических стекол. Значение же этой величины, в каждом из исследованных случаев у лент несколько ниже, чем у монолитов. Замечено так же, что при толщинах ленты 29,4 мкм разброс значений удельной работы резко возрастает до 34,7%. При этом a уже нельзя считать определенным. Возрастание ошибки объясняется нарушением однородности ленты в результате начала кристаллизации.

Но, возможно, кристаллизация у разных марок может начинаться при разных толщинах. Поэтому были проведены опыты по истиранию восьми образцов одной марки – 2НСР. Полученные результаты сведены в таблицу 1, в первой колонке которой приведены значения удельной работы. Каждая цифра в этой колонке есть среднее значение 5-9 измерений. Во второй колонке – относительная погрешность ее измерения (ϵ), а в третьей – толщина образца (b). В таблице данные расположены по мере возрастания этой величины. Закономерное изменение относительной погрешности опыта, как в [2], при этом не наблюдалось: практически все толщины лент менялись в пределах ниже критической. В конце таблицы подведен итог: проставлено среднее значение, найденное примерно для 60 измерений удельной энергии:

$$6,18 \pm 0,28 \text{ МДж/кг}, \epsilon = 4,5\%.$$

Такое заметное повышение точности по сравнению с [2] достигнуто обработкой поверхности зажима, который прижимает образец к абразиву и одновременно связывает ленту с силоизмерителем. Оказывается, определять удельную энергию разрушения стёкол при их механическом диспергировании можно вдвое точнее, чем металлов находящегося в обычном кристаллическом состоянии.

Значение a , найденное для обычного металла 2НСР, составило

$$6,65 \pm 0,7 \text{ МДж/кг}, \epsilon = 10,5\%.$$

что, как и в [2], превышает значение этой же величины, найденной для лент.

Список публикаций:

[1] Глезер А. М. *Аморфно-нанокристаллические сплавы* / Глезер А.М., Шурыгина Н.А. — М.: Физматлит, 2013. — 450 с.

[2] Блинова Е.Ю., Соколова Н.М. // *Двадцатая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных (ВНКСФ-20). Материалы конф., тезисы докл.: Екатеринбург-Ижевск: издательство АСФ России, 2014. С. 104-105*

Электронное строение графеновых нанолент, деформированных растяжением, сжатием

Перекрестова Ксения Владимировна

Волгоградский государственный университет

Лебедев Николай Геннадьевич, д.ф.-м.н.

Perekrestova.95@mail.ru

Актуальность исследования упругих характеристик графеновых нанолент [1, 2] обуславливается структурной чувствительностью их различных физических характеристик, в том числе и механических, а также зависимостью результатов теоретических расчетов от выбранного метода [3, 4]. Последовательное изучение зависимости электронного строения от геометрических параметров может найти широкое применение в разработке наноструктурированных преобразователей энергии, сенсоров и др.

Цель исследования заключается в исследовании электронного строения графеновых нанолент, деформированных растяжением (сжатием). Для достижения цели решались следующие задачи:

- построение геометрических моделей графеновых нанолент типа (H, L), где H – ширина ленты, а L – длина ленты, рассчитанные в элементарных ячейках.
- квантово-химический расчёт электронного строения графеновых нанолент, деформированных растяжением (сжатием), полуэмпирическим методом MNDO [5].
- расчет модулей упругости деформации растяжения (сжатия), как функции длины и ширины графеновых нанолент.

В качестве метода исследования, в работе использовался метод компьютерного моделирования, а именно полуэмпирический метод квантовой химии MNDO.

По итогам работы можно сделать следующие выводы:

Построены геометрические модели графеновых нанолент (H, L). Проведено моделирование деформации растяжения/сжатия, путем варьирования длин нанолент. Величина относительной деформации варьировалась в следующих пределах $\delta = \pm 0.01, \pm 0.07$.

На основе результатов, квантово-химических полуэмпирических расчетах показано, что энергия верхней занятой молекулярной орбитали (Евзмо) и энергия нижней вакантной молекулярной орбитали (Енвмо) – уменьшаются, с увеличением длины наноленты и величины δ .

Проведен расчет модуля упругости (модуля Юнга) графеновых нанолент (H, L) по следующим формулам: